

まず, 位置座標 (coordinate) としては x だけに依存 (depend) する一般的な1次元の量子力学 (quantum mechanics)の問題を定式化(formulate)します.

まず, 系(physical system)のハミルトニアン(Hamiltonian)を $\hat{H} = p^2/(2m) + \hat{V}$ と書き,それによつて定まる状態(state vector)を $|\psi\rangle$ とすると, $|\psi\rangle$ が定常状態(stationary state)の場合のシュレーディンガー方程式 (Schrödinger equation)は $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ という固有値問題 (eigenvalue problem) になります.

これを x 表示 (x -representation) で書くため, 両辺の左から \hat{x} の固有ブラ (eigen-bra) $\langle\psi|$ を掛けると $\langle x|\hat{H}|\psi\rangle = E\langle x|\psi\rangle$ ですが, さらに左辺に $|x\rangle$ の完全性 (completeness)を示す, 等式 $\int dx_1 |x_1\rangle\langle x_1| = 1$ を挿入すると,

$$\int dx_1 \langle x|\hat{H}|x_1\rangle\langle x_1|\psi\rangle = E\langle x|\psi\rangle$$

となります.

そして,

$$\langle x|\hat{H}|x_1\rangle = \langle x|\hat{p}^2/2m + \hat{V}|x_1\rangle E\langle x|\psi\rangle = \frac{1}{2m}\langle x|\hat{p}^2|x_1\rangle + \langle x|\hat{V}|x_1\rangle$$

となりますが, 一般に x 表示での行列要素 (matrix element) $\langle x|V|x_1\rangle$ はポテンシャル(potential)と呼ばれる対角要素 (diagonal element) $V(x)$ によって対角化 (diagonalize)され,

$$\langle x|\hat{V}|x_1\rangle = V(x_1)\delta(x-x_1)$$

の形に書けます. また, $\langle x|\hat{p}|x_1\rangle$ もシュレーディンガー表現では

$$\langle x|\hat{p}|x_1\rangle = \delta(x-x_1)(-i\hbar\frac{d}{dx_1})$$

の形に書けます. ここで $\hbar \equiv h/(2\pi)$ はプランク定数 (Planck constant) です.

そこで, 結局

$$\langle x|\hat{H}|x_1\rangle = H\left(x_1, -i\hbar\frac{d}{dx_1}\right)\delta(x-x_1) = \delta(x-x_1)\left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{d}{dx_1}\right)^2 + V(x_1)\right]$$

と書けますから, シュレーディンガーの波動方程式 (wave equation) は

$$\int dx_1 \langle x|\hat{H}|x_1\rangle\langle x_1|\psi\rangle = E\langle x|\psi\rangle$$

より,

$$H\left(x, -i\hbar\frac{d}{dx}\right)\langle x|\psi\rangle = E\langle x|\psi\rangle$$

なる形に帰着 (reduce) します. ただし

$$H\left(x, -i\hbar\frac{d}{dx}\right) \equiv \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)^2 + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

であり, これを x 表示のハミルトニアンと呼びます.

そこで $\langle x|\psi\rangle$ を状態 $|\psi\rangle$ の x 表示, つまり波動関数 (wave function) と考えて $\psi(x)\equiv\langle x|\psi\rangle$ と定義すれば,方程式の元々の歴史的に馴染み深い形

$$H\left(x, -i\hbar\frac{d}{dx}\right)\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

が再現されます.

この形で, 1次元の箱の中の粒子の問題を考えます. この問題での系はランダウ (Landau & Lifschitz) の教科書の設定によれば, $x\in[0,a]$ では $V(x)=0$, $\neg x\in[0,a]$ では $V(x)=\infty$ なるポテンシャル $V(x)$ で規定されるものです. そこで物理的にも数学的にも $V(x)=\infty$ なる領域 (region): $\neg x\in[0,a]$ では, 確率振幅 (probability amplitude) を示す波動関数の値について, $\psi(x)\equiv\langle x|\psi\rangle=0$ となると考えざるを得ません.

そして箱の境界 (boundary): $x=0, x=a$ では $\psi(x)=0$ であって波動関数が連続 (continuous) である, という合理的 (reasonable), かつ2階常微分方程式 (second-order ordinary differential equation) を解くのに必要十分な境界条件 (boundary condition) の下で, 波動方程式を解けば

$$\psi(x) = \psi_n(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin(k_n x)$$

なる解が得られます.

ただし, $k_n \equiv n\pi/a$ で各々の k_n は

$$H\psi_n = E_n\psi_n, \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad (n=1,2,\dots)$$

なる条件を満たす値です. そして,

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = \int dx \langle \psi_n | x \rangle \langle x | \psi_n \rangle = \int dx \psi_n^*(x) \psi_n(x) = 1$$

となるように規格化 (normalize) されています.

そして, すぐ前の記事の最後では,

"そもそも粒子がエネルギー (energy) $E_n = p_n^2/(2m) + \hat{V}$ に属する定常状態にあつて波動関数が $\psi_n(x) = (2/a)^{1/2} \sin(p_n x/\hbar)$ で与えられる場合を考えると, x による1回の微分ごとに \sin 関数と \cos 関数が入り替わるので, k が奇数 (odd) であれば $\psi_n(x)$ は x 表示での $\hat{p}^k = (-i\hbar d/dx)^k$ の固有関数 (eigen-function) ではありません.

しかし k が偶数 (even) なら $\hat{p}^k \psi_n(x) = (-i\hbar d/dx)^k \psi_n(x) = \hat{p}_n^k \psi_n(x)$ となるので, $\psi_n(x)$ は \hat{p}^k の固有値 (eigen value) p_n^k に属する固有関数ですから, この状態では \hat{p}^k は p_n^k に確定しており, 期待値 (expectation value) $\langle \hat{p}^k \rangle$ が p_n^k に一致することは初めから明らかです.

したがって運動量表示 (momentum representation) であろうと何であろうと, それを用いた計算によって \hat{p}^k の期待値が有限 (finite) でなく発散 (diverge) するようであれば, それは計算方法のどこかに間違い (mistake) があると思われれます."

と書きました.

この時点では後に誤りであると裁定したランダウの本はずいぶん昔に通読した覚えがあるだけで, 当該の問題について詳しく考えたという記憶もありませんでした.